**Голов, Андрей Анатольевич.**

## Взаимосвязь сорбционных и геометрико-топологических кристаллоструктурных свойств цеолитов и каркасных координационных полимеров : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04 / Голов Андрей Анатольевич; [Место защиты: Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН]. - Самара, 2019. - 125 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Голов Андрей Анатольевич

ВВЕДЕНИЕ

Глава 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

Часть 1.1. Микропористые кристаллические материалы

1.1.1. Цеолиты

1.1.1.1. Особенности строения структур цеолитов

1.1.1.2 Дизайн и синтез цеолитных каркасов

1.1.2. Металл-органические координационные полимеры

1.1.2.1. Строение металл-органических координационных полимеров

1.1.2.2. Дизайн пористых металл-органических координационных полимеров

1.1.3. Упорядоченные микропористые углеродные материалы

Часть 1.2. Кристаллические ионные проводники

Часть 1.3. Методы определения характеристик пористости кристаллических структур

1.3.1. Адсорбционные методы

1.3.1.1 Применяемые адсорбтивы

1.3.1.2 Определение общей пористости

1.3.2. Численные методы определения характеристик пористости кристаллических структур

1.3.2.1. Поиск полостей и каналов в кристаллических структурах

1.3.2.2. Определение геометрических и топологических характеристик полостей и каналов... 26 Часть 1.4. Ретикулярная химия и анализ топологии атомной сетки

1.4.1. Модель описания структуры вещества с позиции теории графов

1.4.2. Представление кристаллических структур в виде сеток

1.4.3. Представления сеток

1.4.4. Методы сравнения сеток

1.4.5. Базы данных и номенклатуры сеток

Часть 1.5. Метод натурального тайлинга для исследования пористых структур

1.5.1. Основные определения и свойства разбиения пространства на тайлы

1.5.2. Применение метода тайлинга в кристаллохимии

Часть 1.6. Разбиение Вороного и его применение для анализа свободного пространства структуры

1.6.1. Основные определения и свойства разбиения Вороного

1.6.2. Применение

Глава 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Часть 2.1. Объекты исследования

Часть 2.2. Методы исследования

2.2.1. Методы расчёта характеристик пористости

2.2.1.1. Поиск периодических систем каналов

2.2.1.2. Метод расчёта геометрии пор и каналов

2.2.1.3. Классификация систем каналов

2.2.2. Декомпозиции структуры на строительные единицы

2.2.3. Сборка металл-органических каркасов

2.2.4. Оптимизация геометрии и расчёт энергии кристаллических структур

Часть 2.3. Результаты исследования

2.3.1. Параметры пористости кристаллических сорбентов

2.3.2. Потенциальный структуронаправляющий агент для гипотетического цеолита 1БС-2

2.3.3. Калий-ионные кристаллические проводники

2.3.4. Систематика 3-периодических структур углерода

2.3.5. База данных строительных единиц каркасных МОКП

2.3.6. Новые методы и их программные реализации

Глава 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Часть 3.1. Апробация метода расчёта пористости

Часть 3.2. Сравнение экспериментальной и расчётной ёмкости сорбента НКиБТ-1

Часть 3.3. Каркасные металл-органические координационные полимеры

3.3.1 Систематика полостей и каналов в структурах металл-органических

координационных полимеров

3.3.2. Топологическая систематика систем каналов металл-органических

координационных полимеров

3.3.3. Взаимосвязь сорбционных и геометрико-топологических характеристик полостей и каналов металл-органических координационных полимеров

3.3.4. Строительные единицы каркасных металл-органических координационных полимеров

3.3.5. Рекомендации к направленному дизайну новых структур микропористых сорбентов .... 70 Часть 3.4. 3-периодические аллотропы углерода

3.4.1. Взаимосвязи между строением и свойствами аллотропов углерода

3.4.2. Потенциальные 3-периодические углеродные сорбенты

Часть 3.5. Цеолиты

3.5.1. Геометрии и топологии полостей и каналов в структурах цеолитов

3.5.2. Топология дуального пространства и каналов цеолитов

3.5.3. Геометрия полостей каркаса 1БС-2 и рекомендации по его синтезу

3.5.3.1. Строение цеолита 1БС-2

3.5.3.2. Потенциальный структуронаправляющий агент для синтеза цеолита КС-2

Часть 3.6. Ионные переходы в К-ионных кристаллических проводниках

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ